$(\Delta x)^2$ と $(\Delta p)^2$ は角振動数 $2\omega$ で振動しているが、エネルギー期待値は

$$\langle\zeta|\,\hat{H}\,|\zeta\rangle = \frac{1}{2m}\langle\zeta|\,\hat{p}^2\,|\zeta\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2\langle\zeta|\,\hat{x}^2\,|\zeta\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\cosh^2(2|\zeta|) + \sinh^2(2|\zeta|)\right) \tag{F.55}$$

となり、時間とともに変化しないことに注意。また、最小不確定性状態を与えるのは、変換パラメータ $\zeta$ が実数の場合に限られることがわかる。

# G　球座標・円筒座標系でのラプラシアン

この付録では、ブラケット記法を用いることによって３次元極座標系（球座標）や円筒座標系でのラプラシアン $\Delta$ が、簡単に導出できることを学ぶ。

## G.1　デカルト座標系

最初にデカルト座標系の復習をするとともに記号の整理をしておく。３次元デカルト座標 $(x,y,z)$ では、座標点 $(x,y,z)$ と $(x+dx, y+dy, z+dz)$ の間の距離（線素）は

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 \tag{G.1}$$

で与えられる。３次元積分の無限小体積要素は

$$d^3V = dxdydz \tag{G.2}$$

である。

スカラー関数 $f$ の勾配 (gradient) は

$$\vec{\nabla} f = \left(\frac{\partial}{\partial x}f\right)\vec{e}_x + \left(\frac{\partial}{\partial y}f\right)\vec{e}_y + \left(\frac{\partial}{\partial z}f\right)\vec{e}_z \tag{G.3}$$

で与えられる。$\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$, $\vec{e}_z$ は、それぞれ $x$ 方向, $y$ 方向, $z$ 方向への単位ベクトルである。３次元運動量演算子 $\hat{\vec{p}}$ は

$$|f\rangle = \int d^3V\ |\vec{x}\rangle f(\vec{x})$$

で与えられる状態 $|f\rangle$ に

$$\hat{\vec{p}}|f\rangle = \int d^3V\ |\vec{x}\rangle\left(-i\hbar\vec{\nabla}f(\vec{x})\right) \tag{G.4}$$

と作用する。

次の量を考える。

$$I \equiv \langle f_1|\,\hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{p}}\,|f_2\rangle \tag{G.5}$$

この量がラプラシアン

$$\begin{aligned}\Delta &= \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\end{aligned} \tag{G.6}$$

を用いて

$$I = -\hbar^2\int d^3V\ f_1^*\Delta f_2 \tag{G.7}$$

と計算できることは明らかであろう。

通常の量子力学での仮定にしたがって、状態 $|f_1\rangle$, $|f_2\rangle$ を与える波動関数 $f_1(\vec{x})$, $f_2(\vec{x})$ は二乗可積分であり無限遠方で十分に早くゼロになるとする。このとき、式 (G.5) で与えられる量が、状態 $\hat{\vec{p}}|f_1\rangle$ と状態 $\hat{\vec{p}}|f_1\rangle$ の内積であることは明らかである。

## G.2　円筒座標系

次に円筒座標系 $(r, \theta, z)$ を考える。前節で考察したデカルト座標系との間の関係は

$$x = r\cos\theta, \quad y = r\sin\theta, \quad z = z \tag{G.8}$$

で与えられる。円筒座標系での線素は

$$ds^2 = dr^2 + (rd\theta)^2 + dz^2 \tag{G.9}$$

で与えられる。３次元積分の無限小体積要素は

$$d^3V = dr\, rd\theta\, dz = rdr\, d\theta\, dz \tag{G.10}$$

である。

スカラー関数 $f$ の勾配は

$$\vec{\nabla} f = \left(\frac{\partial}{\partial r} f\right)\vec{e}_r + \left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} f\right)\vec{e}_\theta + \left(\frac{\partial}{\partial z} f\right)\vec{e}_z \tag{G.11}$$

で与えられる。ここで $\vec{e}_\theta$ の係数に現れる $1/r$ の係数は、$\theta$ 方向の線素が $rd\theta$ であったことに起因している。デカルト座標の場合と同様に、状態

$$\hat{\vec{p}}|f_1\rangle = \int d^3V\ |\vec{x}\rangle \left(-i\hbar\vec{\nabla} f_1(\vec{x})\right)$$

と、状態

$$\hat{\vec{p}}|f_2\rangle = \int d^3V\ |\vec{x}\rangle \left(-i\hbar\vec{\nabla} f_2(\vec{x})\right)$$

との内積

$$\begin{aligned} I &\equiv \langle f_1|\,\hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{p}}\,|f_2\rangle \\ &= -\hbar^2 \int d^3V\ f_1^* \Delta f_2 \end{aligned}$$

を考える。次のように部分積分をしてみよう。

$$\begin{aligned} I &= -\hbar^2 \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-\infty}^\infty dz \left[ f_1^* \frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial f_2}{\partial r}\right) + \frac{1}{r} f_1^* \left(\frac{\partial^2 f_2}{\partial\theta^2}\right) + r f_1^* \left(\frac{\partial^2 f_2}{\partial z^2}\right)\right] \\ &= -\hbar^2 \int d^3V f_1^* \left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial f_2}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2 f_2}{\partial\theta^2}\right) + \left(\frac{\partial^2 f_2}{\partial z^2}\right)\right]. \end{aligned}$$

この式をラプラシアンを用いた表式

$$I = -\hbar^2 \int d^3V\, f_1^* \Delta f_2$$

と比較して、円筒座標系でのラプラシアン

$$\Delta f = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r} f\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} f + \frac{\partial^2}{\partial z^2} f \tag{G.12}$$

が求められる。

### G.3 球座標系

最後に３次元極座標系（球座標系）$(r,\theta,\varphi)$ を考察する。デカルト座標系との関係は

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta \tag{G.13}$$

であり、線素および無限小体積要素は

$$ds^2 = dr^2 + (rd\theta)^2 + (r\sin\theta d\varphi)^2, \tag{G.14}$$

$$d^3V = dr\, rd\theta\, r\sin\theta d\varphi = r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi \tag{G.15}$$

で与えられる。スカラー関数 $f$ の勾配は、したがって

$$\vec{\nabla}f = \left(\frac{\partial}{\partial r}f\right)\vec{e}_r + \left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}f\right)\vec{e}_\theta + \left(\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}f\right)\vec{e}_\varphi \tag{G.16}$$

と求められる。デカルト座標の場合と同様に積分

$$\begin{aligned} I &\equiv \hbar^2\int d^3V\,(\vec{\nabla}f_1^*)\cdot(\vec{\nabla}f_2) \\ &= \hbar^2\int_0^\infty dr\int_0^\pi d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\, r^2\sin\theta\left[\left(\frac{\partial f_1^*}{\partial r}\right)\left(\frac{\partial f_2}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial f_1^*}{\partial\theta}\right)\left(\frac{\partial f_2}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta} + \left(\frac{\partial f_1^*}{\partial\varphi}\right)\left(\frac{\partial f_2}{\partial\varphi}\right)\right] \end{aligned}$$

を考え、部分積分をすることでラプラシアンを導出しよう。部分積分の結果は

$$I = -\hbar^2\int d^3V f_1^*\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}f_2\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}f_2\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}f_2\right]$$

であり、これをラプラシアンを使った表式

$$I = -\hbar^2\int d^3V\, f_1^*\Delta f_2$$

と比較することで、球座標系でのラプラシアンが

$$\Delta f = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}f\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}f\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}f \tag{G.17}$$

と求められる。

# H 球座標における角運動量の微分演算子

## H.1 ２次元極座標

２次元極座標 $(r,\theta)$

$$x = r\cos\theta, \qquad y = r\sin\theta \tag{H.1}$$

において、角運動量に対応する微分演算子

$$L^{\mathrm{op}} = xp_y^{\mathrm{op}} - yp_x^{\mathrm{op}} = -i\hbar\left[x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right] \tag{H.2}$$

を求めよう。ここで

$$p_x^{\mathrm{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y^{\mathrm{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \tag{H.3}$$

である。微分のチェーン則

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial x}{\partial r}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial r}\frac{\partial}{\partial y}, \quad \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{1}{r}\frac{\partial x}{\partial \theta}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial y}{\partial \theta}\frac{\partial}{\partial y}, \tag{H.4}$$

と極座標の定義式 (H.1) より

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial r} \\ \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial \theta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} \tag{H.5}$$

はすぐにわかる。これから

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial r} \\ \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial \theta} \end{pmatrix} \tag{H.6}$$

を得るのも容易である。２次元極座標の定義式 (H.1) と式 (H.6) を角運動量に対応する微分演算子の式 (H.2) に代入すると

$$L^{\mathrm{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \theta} \tag{H.7}$$

を得る。

## H.2 ３次元極座標（球座標）

次に、３次元極座標系（球座標系）$(r, \theta, \varphi)$

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta \tag{H.8}$$

における角運動量に対応する微分演算子

$$L_x^{\mathrm{op}} = y\,p_z^{\mathrm{op}} - z\,p_y^{\mathrm{op}}, \quad L_y^{\mathrm{op}} = z\,p_x^{\mathrm{op}} - x\,p_z^{\mathrm{op}}, \quad L_z^{\mathrm{op}} = x\,p_y^{\mathrm{op}} - y\,p_x^{\mathrm{op}} \tag{H.9}$$

を求めよう。ここで、運動量に対応する微分演算子は

$$p_x^{\mathrm{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y^{\mathrm{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z^{\mathrm{op}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \tag{H.10}$$

である。２次元極座標での計算と同様に、微分のチェーン則と球座標の定義 (H.8) を用いると

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial r} \\ \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial \theta} \\ \dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} \\ \dfrac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}, \qquad U = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta \\ \cos\theta\cos\varphi & \cos\theta\sin\varphi & -\sin\theta \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \end{pmatrix} \tag{H.11}$$

と計算できる。式 (H.11) において、行列 $U$ は直交行列であることに注意。従って、その逆行列は

$$U^{-1} = U^{\dagger} = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \cos\theta\cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta\sin\varphi & \cos\varphi \\ \cos\theta & -\sin\theta & 0 \end{pmatrix} \tag{H.12}$$

で与えられ、

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x} \\ \dfrac{\partial}{\partial y} \\ \dfrac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = U^{-1} \begin{pmatrix} \dfrac{\partial}{\partial r} \\ \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial \theta} \\ \dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \tag{H.13}$$

と求まる。3 次元運動量の微分演算子の式 (H.10) に式 (H.13) を代入し、さらに 3 次元角運動量の式 (H.9) に、式 (H.8), と (H.10) を代入することで

$$\begin{aligned} L_x^{\mathrm{op}} &= i\hbar\left[\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right], \\ L_y^{\mathrm{op}} &= i\hbar\left[-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \sin\varphi\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right], \\ L_z^{\mathrm{op}} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{aligned} \tag{H.14}$$

が得られる。

# I　球面調和関数

球面調和関数 $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ は、球座標系 $(r,\theta,\varphi)$

$$x = r\sin\theta\cos\varphi,\quad y = r\sin\theta\sin\varphi,\quad z = r\cos\theta$$

における固有値方程式

$$(\vec{L}^{\mathrm{op}})^2 Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta,\varphi),\qquad (\ell\geq 0),$$

$$L_z^{\mathrm{op}} Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta,\varphi),$$

の解である。この付録では球面調和関数の具体形の計算方法を説明する。

## I.1　$(\vec{L}^{\mathrm{op}})^2$ の具体形

付録 §. H.2 において、球面調和関数の定義に現れる微分演算子 $L_z^{\mathrm{op}}$ の具体形はすでに求まっている。ここでは、球面調和関数を定義するのに用いられるもう一つの微分演算子である $(\vec{L}^{\mathrm{op}})^2$ の具体形を求めよう。

計算の方法はいくつかあるが、ここではふたつのやり方を紹介しよう。

最初の方法は、式 (H.14) の結果を愚直に使って

$$-\frac{1}{\hbar^2}(\vec{L}^{\mathrm{op}})^2 = \left[s_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + c_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\left[s_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + c_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] + \left[-c_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + s_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\left[-c_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + s_\varphi\frac{c_\theta}{s_\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

を計算するやり方である。ここでは、表記のスペースの節約のため、

$$s_\theta = \sin\theta,\quad c_\theta = \cos\theta,\quad s_\varphi = \sin\varphi,\quad c_\varphi = \cos\varphi$$